

SOBRE EL PROCEDIMIENTO DE NORMALIZACIÓN EN LA TERMOESTADÍSTICA DE TSALLIS

G. L. Ferri^{a,*}, S. Martínez^b y A. Plastino^b

^aFacultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de La Pampa, 6300 Santa Rosa, La Pampa Argentina

^bInstituto de Física de La Plata (IFLP), Universidad Nacional de La Plata y CONICET, C.C. 727, 1900 La Plata, Argentina

Pese al innegable éxito del formalismo estadístico no extensivo de Tsallis, aún quedan algunas cuestiones abiertas. Una de ellas es el así llamado “problema de la normalización”, o de cómo deben evaluarse los valores esperados de los operadores. El método de Jaynes para introducir la mecánica estadística, se basa en *extremizar* (maximizar) una entropía específica en presencia de ligaduras físicamente apropiadas. La literatura sobre termoestadística no extensiva ha considerado, durante su evolución histórica, tres elecciones posibles para calcular el valor esperado del operador energía. Una de ellas fue la propuesta por Tsallis en su trabajo original de 1988, la segunda, por el mismo C. Tsallis y E. Curado en 1992 y la tercera por Tsallis, Mendes y Plastino en 1998. Demostramos que la distribución de probabilidades de ocupación de los microestados en todas ellas pueden derivarse de una única fórmula, reinterpretando sus parámetros. Analizamos también una cuarta alternativa, llamada OLM, y estudiamos numéricamente las consecuencias de cada elección.

In spite of its undeniable success, there are still open questions regarding Tsallis' non-extensive statistical formalism. Some of them are about the so-called “normalization” problem of just how to evaluate expectation values. The Jaynes' MaxEnt approach for introducing statistical mechanics is based on the adoption of a specific entropy S and physically appropriate constraints. The literature on non-extensive thermostatistics has considered, in his historical evolution, three possible choices for the evaluation of expectation values: (i) Tsallis-original (TO), (ii) Curado Tsallis (CT), and (iii) Tsallis, Mendes, Plastino, (TMP). A fourth constraint still exists, the so-called “optimal Lagrange multipliers” (OLM). We here i) show that the probability distribution function in each of these instances may be evaluated with a unique formula and ii) numerically analyze some consequences that emerge from these four choices.

1. INTRODUCCIÓN

La estadística no extensiva de Tsallis, considerada hoy como un nuevo paradigma en mecánica estadística [1-6], comprende en realidad una familia de formulaciones, todas ellas basadas en la medida de información no extensiva de Tsallis [7]:

$$S_q^T = k_B \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{1 - q} = k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln_q p_i \quad (1)$$

donde k_B es una constante positiva, $\{p_i\}$ es un conjunto normalizado de probabilidades, y W es el número de microestados accesibles al sistema. El parámetro real q es el índice de no extensividad, y está relacionado estrechamente con la dinámica microscópica del sistema.

En la expresión (1) usamos la función llamada q -logaritmo:

$$\ln_q x = \frac{1 - x^{1-q}}{q-1} \quad (2)$$

La correspondiente función inversa es la q -exponencial:

$$\exp_q x = [1 + (1-q)x]^{1/(1-q)} \quad (3)$$

Ambas funciones son generalizaciones de las funciones ordinarias *logaritmo natural* y *exponencial* las cuales se recuperan en el límite $q \rightarrow 1$. En éste límite, la ecuación (1) recobra la forma usual de Boltzman Gibbs,

$$S_1^{BG} = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \quad (4)$$

La distribución de probabilidades de equilibrio se obtiene extremizando (maximizando) la entropía, con respecto a $\{p_i\}$ sujeto a ciertas restricciones, vía el procedimiento MaxEnt de Jaynes [8-9]. Una de ellas es la normalización de las probabilidades

$$\sum_{i=1}^W p_i = 1 \quad (5)$$

Para el *conjunto microcanónico*, (sistema aislado) ésta será la única restricción. En consecuencia la optimización de S_q nos conduce de inmediato a la equiprobabilidad, o sea $p_i = 1/W$, $\forall i$, y por lo tanto $S_q = k_B \ln_q W$.

Si describimos un sistema en contacto térmico con un reservorio, en el *conjunto canónico*, además de la restricción (5), es necesaria otra que establezca cómo calcular la energía

* Fax: +54-954-432679; E-mail: glferri@exactas.unlpam.edu.ar

interna. En la literatura sobre termodinámica no extensiva, nos encontramos con tres posibles elecciones. La primera de ellas fue introducida por Tsallis en su trabajo original [7], y consiste en:

$$\langle U \rangle_q^{TO} = \sum_{i=1}^W p_i \quad (6)$$

donde el supraíndice *TO*, indica “*Tsallis Original*”, y $\{p_i\}$ son los autovalores del Hamiltoniano cuántico del sistema. En otras palabras, se mantiene la definición usual de energía interna.

La segunda fue propuesta en 1991, por Curado y Tsallis [10]:

$$\langle U \rangle_q^{CT} = \sum_{i=1}^W p_i^q \quad (7)$$

donde el supraíndice *CT*, indica “*Curado Tsallis*”.

La tercer elección para la restricción de la energía interna del sistema, se debe a Tsallis, Mendes y Plastino, en 1998 [6,11], y es actualmente la más usada. En ella se pesan los autovalores del Hamiltoniano con un conjunto de probabilidades $p_i^q / \sum_{j=1}^W p_j^q$:

$$\langle U \rangle_q^{TMP} = \frac{\sum_{i=1}^W p_i^q}{\sum_{i=1}^W p_i^q} \quad (8)$$

donde el supraíndice *TMP*, indica “*Tsallis, Mendes, Plastino*”.

El uso de una u otra restricción, (6), (7), (8) conduce a distintas termoestadísticas. A cada una de ellas le corresponde una distinta distribución de probabilidades. En este trabajo demostramos que todas ellas se derivan de una sola fórmula que depende de un parámetro. Cambiando ese parámetro pasamos de una distribución a otra. Mostraremos además algunas características propias de cada una.

2. FORMALISMO

a) *Obtención de las distribuciones de probabilidad por el método de Jaynes,*

Mostramos a continuación el procedimiento de obtener la distribución de probabilidades para la segunda elección (*CT*). La cantidad a maximizar es:

$$L = S_q^T - \left(\sum p_i - 1 \right) - \left(\sum p_i^q - U_q \right) \quad (9)$$

α y β son los multiplicadores de Lagrange.

$$\frac{\partial L}{\partial p_i} = \frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \alpha - \beta p_i^{q-1} = 0 \quad (10)$$

Si multiplicamos la ec. (10) por p_i y luego sumamos sobre los i , podemos despejar α :

$$= \frac{q}{1-q} \sum p_i^q - \alpha U_q \quad (11)$$

con U_q dado por la ecuación (7). Reemplazando (11) en (10), y despejando p_i :

$$p_i = \frac{[1 - (1-q)]^{1/(1-q)}}{[q - (1-q) U_q]^{1/(1-q)}} \quad (12)$$

donde hemos puesto:

$$q = \sum p_i^q \quad (13)$$

Si ahora sumamos sobre todos los valores de i encontramos que:

$$[q - (1-q) U_q]^{1/(1-q)} = \sum [1 - (1-q)]^{1/(1-q)} \quad (14)$$

Con lo que finalmente obtenemos la distribución de probabilidades:

$$p_i^{CT} = \frac{[1 - (1-q)]^{1/(1-q)}}{\sum_i [1 - (1-q)]^{1/(1-q)}} \quad (15)$$

si $1 - (1-q) > 0$, y

$$p_i^{CT} = 0,$$

en caso contrario.

O bien, en términos de las q -exponenciales:

$$p_i^{CT} = \frac{\exp_q(-)}{\sum_i \exp_q(-)} \quad (16)$$

Como esta distribución debe recobrar la distribución de Boltzman-Gibbs en el límite $q \rightarrow 1$, asociamos el multiplicador de Lagrange β con la temperatura inversa, $\beta = 1/k_B T$. Los p_i pueden calcularse de una manera directa para cualquier temperatura con sólo conocer los autovalores del Hamiltoniano.

Repetiendo ahora el mismo procedimiento con las restricciones *TO* y *TMP*, obtenemos lo siguiente:

$$p_i^{TO} = \frac{\left[1 - \frac{q-1}{q} \frac{(p_i - U_q^{TO})}{q} \right]^{1/(1-q)}}{\sum_i \left[1 - \frac{q-1}{q} \frac{(p_i - U_q^{TO})}{q} \right]^{1/(1-q)}} \quad (17)$$

y

$$p_i^{TMP} = \frac{\left[1 - (1-q) \frac{(U_i - U_q^{TMP})}{q} \right]^{1/(1-q)}}{\sum_i \left[1 - (1-q) \frac{(U_i - U_q^{TMP})}{q} \right]^{1/(1-q)}} \quad (18)$$

En estos casos, el cálculo de los p_i ya no es directo porque las ecuaciones (17) y (18) son auto-referenciales, ya que p_i está incluido en U_q y en χ_q .

b) *Forma paramétrica de las distribuciones de probabilidad.*

Pueden tenerse expresiones para las ec. (17) y (18) que no sean auto-referenciales, apelando al siguiente truco. En la ec. (17) tomamos factor común en el numerador y en el denominador, el término $\left[1 + (q-1) \frac{U_i^{TO}}{U_q^{TO}} \right]^{1/(q-1)}$, y luego lo cancelamos con lo que la distribución de probabilidad queda:

$$p_i^{TO} = \frac{\left[1 - (q-1) \frac{*}{U_q^{TO}} \right]^{1/(q-1)}}{\sum_i \left[1 - (q-1) \frac{*}{U_q^{TO}} \right]^{1/(q-1)}} \quad (19)$$

con

$$* = \frac{1}{q - q + (q-1) U_q^{TO}} \quad (20)$$

La ecuación (19) resulta ser formalmente idéntica a la ec. (15) que da los p_i en la versión CT , salvo que $(1-q)$ está cambiado por $(q-1)$, y en (19), $*$ es un parámetro que no es la temperatura inversa, pero que depende de ella, como está dicho en la ec. (20). Si definimos $* = 1/k_B T^*$, podemos establecer una relación entre el parámetro T^* y la temperatura termodinámica T :

$$k_B T = \frac{k_B T^* - (q-1) U_q^{TO}}{q - q} \quad (21)$$

Con esto podemos calcular la energía interna en función de la temperatura de una manera directa: Para un conjunto de valores de T^* , (y por lo tanto de β^*) calculamos las probabilidades con la ec. (19). Con estos valores calculamos U_q , ec. (6) y χ_q , ec. (13), y luego, mediante la ec. (21), obtenemos las temperaturas correspondientes. Finalmente graficamos U_q en función de T .

El mismo procedimiento aplicado a la ecuación (18) nos permite obtener la distribución de probabilidades en forma paramétrica para la versión TMP ,

$$p_i^{TMP} = \frac{\left[1 - (1-q) \frac{*}{U_q^{TMP}} \right]^{1/(1-q)}}{\sum_i \left[1 - (1-q) \frac{*}{U_q^{TMP}} \right]^{1/(1-q)}}, \quad (22)$$

$$* = \frac{1}{q + (1-q) U_q^{TMP}} \quad (23)$$

$$k_B T = \frac{k_B T^* - (1-q) U_q^{TMP}}{q} \quad (24)$$

Existe en la literatura, una cuarta forma de considerar la restricción para la energía interna, que está basada en la normalización TMP pero caracterizada por una manera peculiar de abordar el proceso de extremización, llamada OLM , (por las siglas en inglés de *Multiplicadores Óptimos de Lagrange*) [12, 13]. La condición de restricción se escribe:

$$\sum_i p_i^q = \sum_i p_i^q U_q^{TMP-OLM}$$

La distribución de probabilidades que se obtiene en esta versión es:

$$p_i^{TMP-OLM} = \frac{\left[1 - (1-q) \frac{*}{U_q^{TMP-OLM}} \right]^{1/(1-q)}}{\sum_i \left[1 - (1-q) \frac{*}{U_q^{TMP-OLM}} \right]^{1/(1-q)}}, \quad (25)$$

$$* = \frac{1}{1 + (1-q) U_q^{TMP-OLM}}, \text{ y} \quad (26)$$

$$k_B T = k_B T^* - (1-q) U_q^{TMP-OLM} \quad (27)$$

En resumen, para las cuatro versiones de la termostadística no extensiva, podemos usar una única fórmula para la distribución de probabilidades de ocupación de los microestados, y podemos pasarnos de una a otra con sólo reinterpretar los parámetros que intervienen en ella, como se muestra en la tabla I.

c) *El “cut-off” de Tsallis*

El análisis de las ecuaciones (15), (19), (22) y (25) nos permite apreciar que para $q > 1$ en CT , TMP y $TMP-OLM$, y para $q < 1$ en TO , los niveles de energía ϵ_i están siempre ocupados cualquiera sea i . En este caso el escenario no extensivo es cualitativamente idéntico al de Boltzman Gibbs, en el cual todos los niveles de energía tienen una probabilidad no nula de estar ocupados a temperatura finita. La situación es distinta para $q < 1$ en CT , TMP y $TMP-OLM$, y para $q > 1$ en TO . Para valores dados de temperatura y del parámetro q , aparecen p_i 's nulos. Los niveles de energía comparativamente más altas permanecen vacíos. En la figura 1 mostramos estas características para la versión CT . Este efecto es conocido como el “cut-off” de Tsallis.

TABLA I

Termoestadística no extensiva				
Distribución de Probabilidades				
$p_i = \frac{[1 - (1-q)^{\epsilon_i}]^{1/(1-q^*)}}{\sum_i [1 - (1-q^*)^{\epsilon_i}]^{1/(1-q^*)}}, \text{ si } \epsilon_i < \frac{1}{1-q^*}$ $p_i = 0, \text{ si } \epsilon_i > \frac{1}{1-q^*}$				
Versión	ϵ	q^*	U_q	T
TO	$\epsilon = \frac{U_q - U_q^{TO}}{q + (q-1)U_q^{TO}}$	$q^* = 2-q$	$U_q^{TO} = \sum_{i=1}^W p_i \epsilon_i$	$k_B T = \frac{k_B T^* - (q-1)U_q^{TO}}{q - q^*}$
CT	$\epsilon =$	$q^* = q$	$U_q^{CT} = \sum_{i=1}^W p_i^q \epsilon_i$	$k_B T = k_B T^*$
TMP	$\epsilon = \frac{U_q^{TMP} - U_q^{TMP}}{q + (1-q)U_q^{TMP}}$	$q^* = q$	$U_q^{TMP} = \frac{\sum_{i=1}^W p_i^q \epsilon_i}{\sum_{i=1}^W p_i^q}$	$k_B T = \frac{k_B T^* - (1-q)U_q^{TMP}}{q}$
TMP OLM	$\epsilon = \frac{U_q^{TMP-OLM} - U_q^{TMP-OLM}}{1 + (1-q)U_q^{TMP-OLM}}$	$q^* = q$	$U_q^{TMP-OLM} = \frac{\sum_{i=1}^W p_i^q \epsilon_i}{\sum_{i=1}^W p_i^q}$	$k_B T = k_B T^* - (1-q)U_q^{TMP-OLM}$

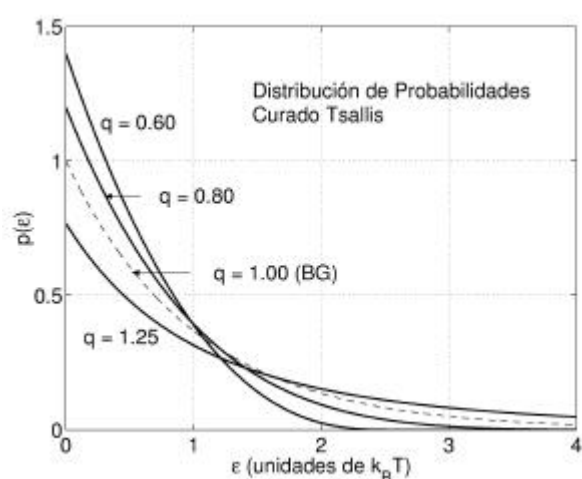


Figura 1: Función distribución de probabilidad para la termoestadística no extensiva en su versión CT. Con $q < 1$, $p(\epsilon)$ 0 a partir de cierto valor de ϵ en adelante. La distribución de Boltzmann Gibbs ($q = 1$) actúa como límite entre dos comportamientos cualitativamente distintos.

3. CÁLCULOS NUMÉRICOS

a) La energía interna

Para ilustrar las propiedades de cada una de las versiones de la termoestadística no extensiva, computamos la energía interna y el calor específico para un sistema de niveles de

energía correspondientes a un oscilador armónico: $\epsilon_n = n \epsilon_0$, con $n = 0, 1, 2, \dots$, y $\epsilon_0 = \hbar \omega$.

Como consecuencia del “cut-off”, para $q < 1$ en CT, TMP y TMP-OLM, y para $q > 1$ en TO, si T (o T^*) es suficientemente bajo, $k_B T \leq (1-q)\epsilon_0$, sólo estará ocupado el nivel más bajo: $p_0 = 1$, y $p_i = 0$, $i \geq 1$. Nuestro sistema no puede absorber energía continuamente: Aunque $T > 0$, la energía del sistema no puede cambiar hasta que $k_B T^*$ alcance y sobrepase el valor crítico $(1-q)\epsilon_0$. En ese momento, el nivel ϵ_1 está disponible y la energía interna experimenta un salto en su pendiente. Este crecimiento se sostiene hasta que se hace accesible el nivel $n = 2$, $[k_B T^* \geq (1-q)\epsilon_2]$. Es entonces cuando aparece un nuevo salto en la pendiente, y así sucesivamente.

Para ilustrar este efecto, graficamos, en la figura 2, para un modelo de niveles equidistantes y $q = 0.60$, la energía interna en función de la temperatura, en las versiones CT, TMP, y TMP-OLM. En los ejes representamos cantidades adimensionales $u_q = U_q / \epsilon_0$, y $t = k_B T / \epsilon_0$. Las curvas TMP, y TMP-OLM se obtienen a partir de los valores de CT, cambiando el parámetro ϵ . El cambio respecto a la curva CT, depende de la relación entre T y T^* que se muestra en la figura 3. Los cambios de pendiente se van suavizando a medida que

aumenta la temperatura, y también cuando q se aproxima a uno.

El comportamiento de U_q vs. T cambia cualitativamente para q por debajo de un valor crítico q_c en las versiones *TMP* y *TMP-OLM*: T deja de ser monótonamente creciente con T^* y en la energía aparece una *multivaluación* (esto no ocurre en *CT*). El valor de q_c es de 0.50 en la versión *TMP-OLM*, y de 0.56 en la versión *TMP*. Este cambio de comportamiento lo podemos apreciar en las figuras 4 y 5 donde hemos hecho $q = 0.40$. En la versión *TO* con $q > 1$ donde también hay saltos en la pendiente de U_q , no aparecen multivaluaciones para ningún valor de $q > 0$.

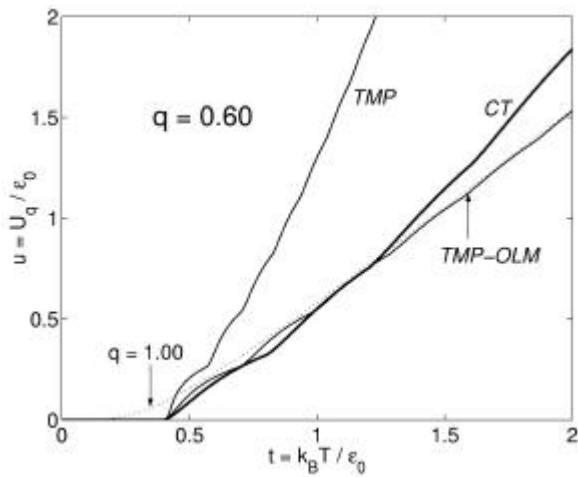


Figura 2: Energía interna en función de la temperatura para las versiones *CT*, *TMP* y *TMP-OLM*, donde puede observarse el cambio de pendiente cada vez que se habilita un nuevo nivel de energía. Este comportamiento es el característico para $q < 1$. Se muestra para comparación la energía que correspondería a $q = 1$, en línea de puntos

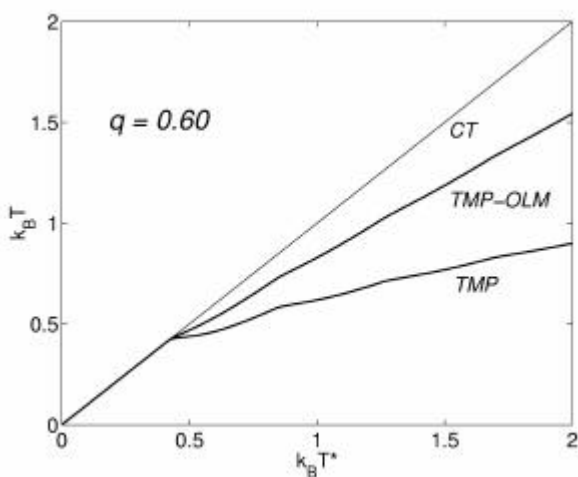


Figura 3: Relación entre T y T^* . T es monótona creciente respecto de T^* con $q < q_c$

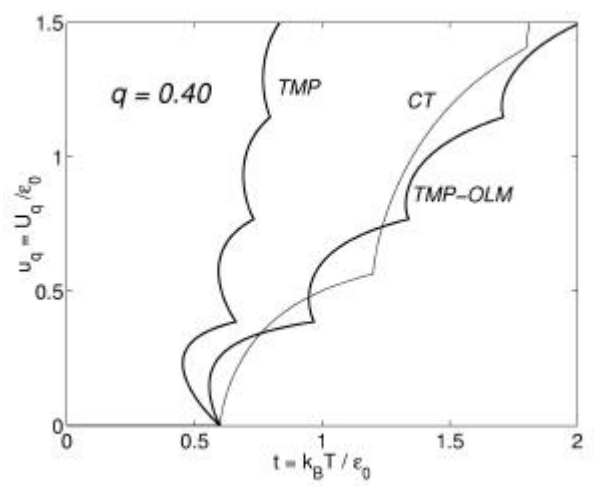


Figura 4: Para $q < q_c < 1$ aparecen multivaluaciones en la energía interna, en las versiones *TMP* y *TMP-OLM*.

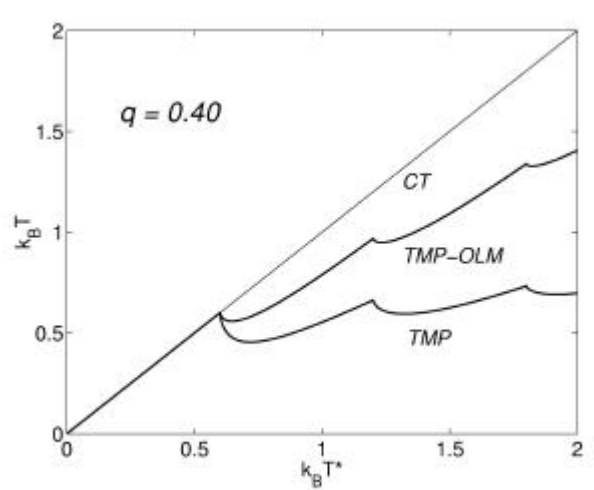


Figura 5: Relación entre T y T^* cuando $q < q_c$. T no es monótonamente creciente con T^* y eso provoca la multivaluación en la energía.

b) El calor específico

Calculamos también el calor específico:

$$C_q = \frac{\partial U_q}{\partial T} \quad (28)$$

ó bien

$$C_q = T \frac{\partial S_q}{\partial T} \quad (29)$$

en las cuatro versiones para distintos valores de q . Cualquiera de las dos formas (28) y (29) deberían ser equivalentes para calcular el calor específico, sin embargo, en la versión *TMP-OLM*, ambas formas son equivalentes sólo si se apela, en la ec. (29) a la entropía de Renyi [4, 13].

Es ilustrativo observar las características del calor específico para valores de q por encima y por debajo de uno, para apreciar las diferencias cualitativas en ambos casos. Siempre el valor $q = 1$ hace de límite para el cambio cualitativo de comportamiento. Los saltos de pendiente en la energía interna debidos al “cut off” se hacen evidentes en las curvas del calor específico. Fig. 6 y 7.

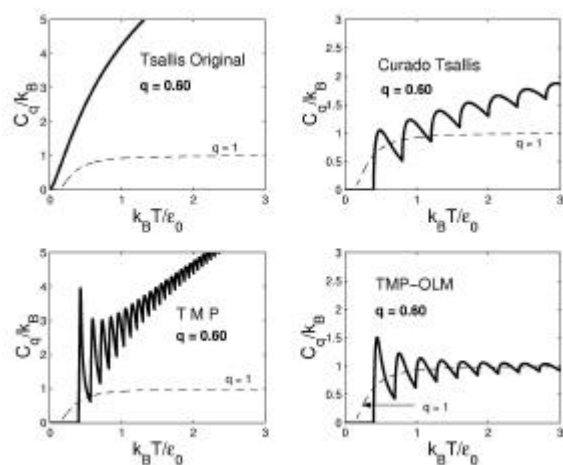


Figura 6: Calor específico para las cuatro versiones con $q = 0.60$.

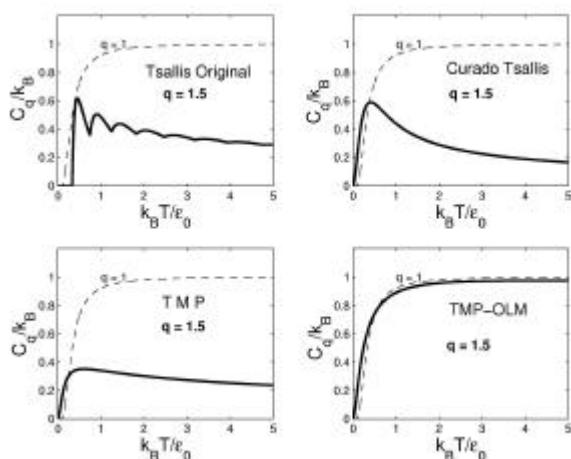


Figura 7: Calor específico para las cuatro versiones con $q = 1.50$.

4. CONCLUSIONES

Trabajando con las ligaduras de la termoestadística no extensiva, hemos demostrado que la distribución de probabilidades en las cuatro versiones está dada por una fórmula única, en la que hay que interpretar adecuadamente en

cada una el parámetro q , y en el caso de la versión TO , hacer además la transformación $q \rightarrow 2 - q$. La distribución de probabilidades de la versión CT resulta ser una importante herramienta para el cálculo numérico en cualquiera de las otras versiones.

Mostramos algunas características de la energía interna y el calor específico: (i) los saltos de pendiente, consecuencia del “cut off” en las p_i que aparece para $q < 1$ en CT , TMP y $TMP-OLM$, y para $q < 1$ en TO . (ii) la aparición de valores críticos de q , en ambas versiones TMP , por debajo de los cuales, la energía interna aparece multivaluada.

REFERENCIAS

- [1] - Bibliografía actualizada periódicamente sobre termodinámica no extensiva puede encontrarse en la URL <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>
- [2] - C. Tsallis, *Chaos, Solitons and Fractals* **6**, (1995) 539; *Physics World* **10** (1997) 42.
- [3] - C. Tsallis, *Bras. J. Phys.* **29** (1999) 1.
- [4] - S. Abe and Y. Okamoto, *Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications*, Lectures Notes in Physics **560** (Springer-Verlag, Heidelberg, 2001)
- [5] - A. Plastino and A. R. Plastino, *Bras. J. Phys.* **29** (1999) 50; ibidem 79.
- [6] - F. Pennini, A. R. Plastino and A. Plastino, *Physica A* **258** (1998) 446.
- [7] - C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **42** (1998) 479
- [8] - E. T. Jaynes, in: *Statistical Physics*, ed. W. K. Ford (Benjamin, NY, 1963), p. 181.
- [9] - A. Katz, *Principles of Statistical Mechanics, The Information Theory Approach* (Freeman and Co., San Francisco, 1967).
- [10] - E. N. F. Curado and C. Tsallis, *J. Phys. A* **24** (1991) L69; Corrigenda: *24* (1991) 3187 and **25** (1992) 1019.
- [11] - C. Tsallis, R. S. Mendes and A. Plastino, *Physica A* **261** (1998) 534.
- [12] - S. Martínez, S. Nicolás, F. Pennini, A. Plastino, *Physica A* **286** (2000) 489.
- [13] - G. L. Ferri, S. Martínez, A. Plastino, *Physica A* (en prensa), 2004